

Vizualiziranje faznih prijelaza vode

Tokić, Karla

Undergraduate thesis / Završni rad

2021

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Split, University of Split, Faculty of science / Sveučilište u Splitu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:166:330154>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-05-17**

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Science](#)



Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno – matematički fakultet

Vizualiziranje faznih prijelaza vode

Završni rad / Bachelor thesis

Karla Tokić

Split, 27. rujna 2021.

Temeljna dokumentacijska kartica

Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno – matematički fakultet
Odjel za fiziku
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Hrvatska

Završni rad

Vizualiziranje faznih prijelaza vode

Karla Tokić

Sveučilišni preddiplomski studij Fizika

Sažetak:

Fazni prijelazi vode su od iznimne važnosti za opstanak života na Zemlji, a njihovo razumijevanje je lakše kada se oni vizualiziraju faznim dijagramom. Faza je definirana kao stanje ujednačenih kemijskih i fizikalnih svojstava, a fazna granica kao prijelaz između dvije faze. Grafički prikaz je ostvaren pomoću matematičkog alata GeoGebre, unutar kojeg je omogućen interaktivan način rada. Cilj izrade ovakve vizualizacije faznih prijelaza je omogućiti korisniku jednostavniji i pristupačniji dolazak do saznanja o karakterističnim pojmovima koji definiraju sami fazni dijagram.

Ključne riječi: fazni prijelaz, fazni dijagram, fazne granice, Gibbsova energija, GeoGebra

Rad sadrži: 16 stranica, 12 slika, 8 literaturnih navoda. Izvornik je na hrvatskom jeziku

Mentor: doc. dr. sc. Martina Požar

Ocjenjivač doc. dr. sc. Martina Požar
doc. dr. sc. Bernarda Lovrinčević
Josipa Šćurla, mag.phys.

Rad prihvaćen: 27. rujna 2021.

Rad je pohranjen u knjižnici Prirodoslovno – matematičkog fakulteta, Sveučilišta u Splitu.

Basic documentation card

University of Split
Faculty of Science
Department of Physics
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Croatia

Bachelor thesis

Title of the thesis

Karla Tokić

University undergraduate study programme Physics

Abstract:

Phase transitions of water are extremely important for the survival of life on Earth, the easiest way to understand them is through phase diagram. A phase is defined as a state of uniform chemical and physical properties, and a phase boundary as a transition between two phases. The graphical display was achieved using the mathematical tool GeoGebra, within which an interactive mode is enabled. The aim of creating such a visualization of phase transitions allows the user to more easily access the knowledge of the characteristic concepts that define the phase diagram itself.

Keywords: phase transition, phase diagram, phase boundary, Gibbs energy, GeoGebra

Thesis consists of: 16 pages, 12 figures, 8 references. Original language: Croatian

Supervisor: Assist. Prof. Dr. Martina Požar

Reviewers: Assist. Prof. Dr. Martina Požar
Assist. Prof. Dr. Bernarda Lovrinčević
Josipa Šćurla, mag.phys.

Thesis accepted: September 27th, 2021.

Thesis is deposited in the library of the Faculty of Science, University of Split.

Sadržaj

1	Uvod.....	1
2	Temeljni pojmovi.....	2
2.1	Primjer: Natkritični fluid	4
3	Primjeri faznih dijagrama.....	5
3.1	Fazni dijagram ugljikovog dioksida	5
3.2	Fazni dijagram vode	6
4	Lociranje faznih granica.....	8
4.1	Clapeyronova jednažba.....	8
4.2	Granica krute i tekuće faze	9
4.3	Granica tekuće i plinovite faze, te krute i plinovite faze	10
5	Rad u GeoGebri	11
5.1	Izrada faznog dijagrama.....	11
6	Zaključak.....	15
7	Literatura.....	16

1 Uvod

Jedan od osnovnih uvjeta za život jest voda, za koju znamo da se u mnogo različitih formi i oblika pojavljuje u prirodi. Osim što čini 70% Zemljine površine, voda je jedina poznata tvar koja može postojati u plinovitoj, tekućoj i krutoj fazi u uskom rasponu temperatura i tlakova koji se javljaju na Zemlji. Bitan je sastav svih živih organizama, a tako i same Zemlje u čijoj atmosferi dolazi do najvažnijeg hidrološkog procesa za život kakvog poznajemo, a to je kruženja vode u prirodi. Isparavanjem vode sa Zemljine površine ona se kondenzira i vraća na Zemlju u obliku kiše, tuče ili magle [1]. Upravo u ovakvoj cirkulaciji vode važni su fazni prijelazi koje, radi lakšeg razumijevanja, prikazujemo pomoću faznih dijagrama.

U ovom radu prvo se uvode temeljni pojmovi koji su potrebni za razumijevanje i pravilno čitanje faznih dijagrama. Također se grafički prikazuju i temeljito uspoređuju fazni dijagrami ugljikovog dioksida i vode te ističući sličnosti i razlike među njima, moguće je uočiti jedinstveno ponašanje vode. Za kraj teorijskog dijela objašnjena je veza između kemijskog potencijala i Gibbsove energije te načina na koji je moguće preko ovih veličina odrediti fazne granice [2]. Nastavak rada se bazira na praktičnom dijelu izrade vizualizacije faznog prijelaza za čiju izradu je korišten matematički digitalni alat GeoGebra [3].

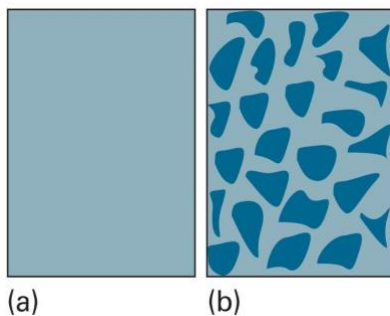
Motivacija pisanja završnog rada na ovu temu je stvoriti sadržaj koji je lako razumljiv i pristupačan studentima i/ili učenicima koji će ga koristiti. Iako već postoje primjeri faznih dijagrama vode¹ na Internetu, neki od njih teško su razumljivi široj publici [4,5]. Korištenjem 3D prikaza i isticanjem previše detalja na grafičkom prikazu otežava se čitanje grafa. Iz navedenih razloga cilj ovog završnog rada je napraviti grafički što jednostavniju vizualizaciju faznih prijelaza vode koja će moći biti iskorištena u edukativnu svrhu za studente različitih smjerova i razina predznanja.

¹ <http://biomodel.uah.es/Jmol/plots/phase-diagrams/>
<https://demonstrations.wolfram.com/PressureTemperaturePhaseDiagramForWater/>
<http://www.soton.ac.uk/~pasr1/interact.htm>

2 Temeljni pojmovi

Najefikasniji način za opis faznih prijelaza u tvarima je preko faznog dijagrama, ali da bi dobro znali pročitati takav dijagram treba poznavati ključne pojmove i fizikalne veličine koje ga opisuju. Dobar primjer promjene faze bez promjene kemijskog sastava tvari su isparavanje i kondenzacija. Prirodno se postavlja pitanje što je to faza i što je fazni prijelaz?

Faza tvari je stanje u kojem je kemijski sastav i fizičko stanje sustava na makroskopskoj razini ujednačeno. Promotrimo li leguru dvaju metala kao na slici 1., ona može činiti jednofazni sustav kao na slici 1. pod a) ili kao pod b) dvofazni sustav, ako se metali ne miješaju.



Slika 1. Shematski prikaz:

a) jednofaznog sustava,

b) disperzija, dvofazni sustav.

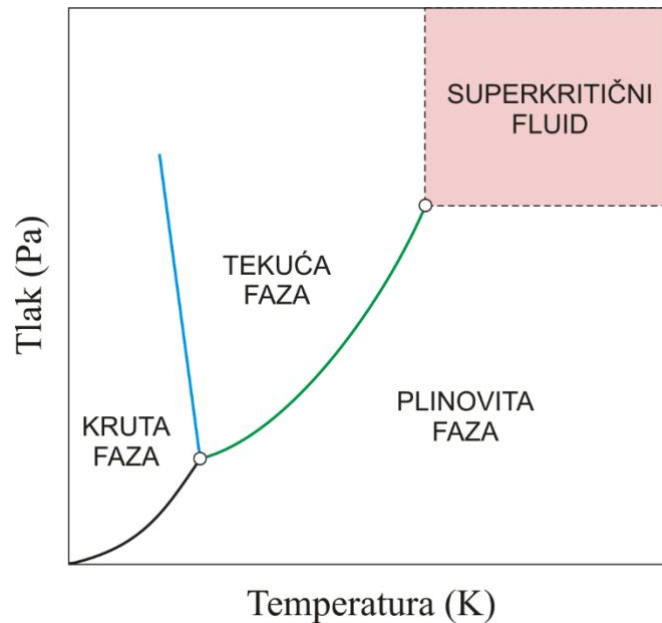
(Slika preuzeta iz izvora [2])

Ako se metali dobro miješaju onda je sastav legure ujednačen na mikroskopskoj i makroskopskoj razini. U takvoj homogenoj smjesi atomi metala A su jednako okruženi drugim atomima metala A i metala B, ma koliko malen bio uzorak koji promatramo i on reprezentira cijeli uzorak. S druge strane disperzijski uzorak je ujednačen na makroskopskoj, ali ne i na mikroskopskoj razini. Maleni uzorak izrezan iz legure mogao bi sadržavati samo atome metala A i tako ne bi predstavljao cijeli uzorak.

Fazni prijelaz je spontani proces koji se javlja pri karakterističnoj temperaturi za određeni tlak pri kojem tvar prelazi iz jedne u drugu fazu. Temperatura prijelaza, T_{tr} , jest temperatura pri kojoj su dvije faze u ravnoteži, za vodu pri atmosferskom tlaku temperatura prijelaza leda u vodu i obrnuto je 0°C . Pri određenim temperaturama tvari se duže vrijeme nalaze u termodinamički nestabilnim fazama jer je prijelaz kinematički ograničen, takva faza se naziva metastabilna faza.

Kruta, tekuća i plinovita faza su tri su fundamentalne faze sustava čije odnose prikazujemo grafički u faznom dijagramu (vidi sliku 2.). Svaka točka faznog dijagrama prikazuje vrijednosti tlaka i temperature pri kojima su faza ili faze tvari stabilne. Linije koje odvajaju područja stabilnih faza nazivaju se fazne granice i u tim područjima dvije faze koegzistiraju u ravnoteži.

Promatramo li tekućinu u zatvorenoj posudi, pritisak koji para u ravnoteži s tekućinom stvara nazivamo tlak pare. Fazna granica u kojoj koegzistiraju tekućina i plin prikazuje ovisnost tlaka pare o temperaturi. Povećavanjem temperature molekule imaju sve veću kinetičku energiju i mogu pobjeći s površine tekućine i tako povećati tlak pare. Slično granica krute i plinovite faze prikazuje ovisnost tlaka pare čvrste faze o temperaturi.



Slika 2. Generalni prikaz faznog dijagrama.

(Izvor : E.

Generalic, <https://glossary.periodni.com/glosar.php?hr=superkriti%C4%8Dni+fluidmot> [6])

Promotrimo li fazni dijagram vidimo da ga karakteriziraju dvije točke i tri linije :

- kritična točka – točka u kojoj tekuća i plinovita faza koegzistiraju
- trojna točka – točka u kojoj u ravnoteži postoje sve tri faze
- krivulja taljenja ili smrzavanja – prijelaz između krute i tekuće faze
- krivulja isparavanja ili kondenzacije – prijelaz između tekuće i plinovite faze
- krivulja sublimacije ili taloženja – prijelaz između plinovite i krute faze .

Zagrijavanjem tekućine u otvorenoj posudi, tekućina isparava s površine. Kada se postigne temperatura pri kojoj tlak pare odgovara vanjskom tlaku, do isparavanja može doći u najvećem dijelu tekućine i para se može slobodno proširiti u okolinu. Ovaj proces naziva se vrenje, a temperatura pri kojoj se događa ovaj proces naziva se temperatura vrenja pri tom tlaku. Pri vanjskom tlaku od 1 atm temperaturu vrelišta nazivamo normalna točka vrenja i ona za vodu iznosi 100.0°C. Temperatura vrenja pri tlaku od 1 bara naziva se standardna točka vrenja i za vodu ona iznosi 99.6°C.

U drugom slučaju kada zagrijavamo tekućinu u zatvorenoj posudi ne dolazi do vrenja već se događa potpuno drugačiji proces. Zagrijavanjem tekućine tlak pare raste i gustoća plinovite faze se povećava, dok se gustoća tekuće faze smanjuje zbog širenja. U jednom trenutku gustoće tekuće i plinovite faze su jednake i površina tekućine se više ne može razaznati. Temperatura pri kojoj dolazi do ovakve pojave naziva se kritična temperatura, T_c , a tlak na toj temperaturi se naziva kritičan tlak, p_c . Ova točka na faznom dijagramu je prikazana kao kraj krivulje

isparavanja i naziva se kritična točka. U području temperatura viših od kritične temperature cijeli prostor zauzima ujednačena faza koju nazivamo natkritični fluid.

Temperatura na kojoj se, pri određenom tlaku, tekuća i kruta faza nalaze u ravnoteži naziva se temperatura taljenja ili temperatura smrzavanja, pošto se tvar topi i smrzava na istoj temperaturi. Također razlikujemo normalnu i standardnu točku smrzavanja/taljenja, kao temperature smrzavanja/taljenja pri tlaku od 1 atm i tlaku od 1 bar.

Točka u kojoj se spajaju sve tri linije faznih prijelaza naziva se trojna točka i ona označava područje u kojem se sve tri faze spontano koegzistiraju u ravnoteži. Trojna točka se za većinu tvari nalazi ispod standardnih vrijednosti temperatura i tlakova, te je karakteristična za svaku tvar. Uzmimo za primjer vodu, njena trojna točka leži na temperaturi 273.16 K i tlaku od 611 Pa. Led, tekuća voda i vodena para koegzistiraju samo pri navedenim uvjetima i to se ne može ponoviti za niti jednu drugu kombinaciju temperature i tlaka. Invarijantnost trojne točke poslužila je pri definiranju termodinamičke temperaturne skale.

2.1 Primjer: Natkritični fluid

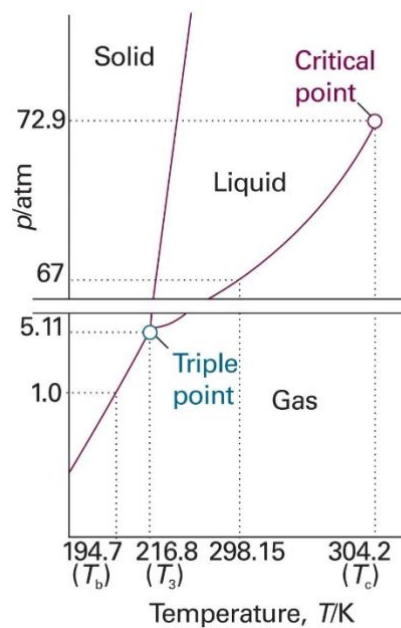
U ekstremnim uvjetima kada se tekućinu dovede na temperaturu i tlak iznad kritične točke dolazi do pojave natkritičnog fluida. On pokazuje zanimljiva svojstva koja se mogu pripisati tekućinama (velika gustoća) i plinovima (velika difuzivnost, niska viskoznost). Zbog svoje lake dostupnosti natkritični fluid koji je u središtu pozornosti kao zamjena za organska otapala jest ugljikov dioksid (scCO_2), koji također služi kao alternativa u procesima koji ne štete okolišu. Velika prednost scCO_2 je laka dostupnost kritične temperature scCO_2 od 304.2 K (31°C) i tlaka, 72.9 atm, uz činjenicu da se lako reciklira i da je jeftin. Nakon isparavanja scCO_2 nema štetnih ostataka i idealan je za preradu hrane i proizvodnju lijekova. Koristi se za uklanjanje kofeina iz kave i za kemijsko čišćenje kao zamjena za kancerogene i ekološki štetne klorirane ugljikovodike.

Visoka gustoća u kombinaciji s difuzijom daje natkritičnom fluidu scCO_2 vrlo dobro svojstvo otapala. S druge strane uvjete kritične temperature vode od 374°C i kritičnog tlaka od 218 atm puno je teže ostvariti, uz to su svojstva tekućine vrlo osjetljiva na tlak.

3 Primjeri faznih dijagrama

Sve znanosti o materijalima u centru svog istraživanja promatraju ravnotežne faze i njihove prijelaze, koje se najlakše uočavaju preko grafičkog prikaza. Pogledajmo sada kako su osnovne značajke opisane u prethodnim poglavljima prikazane u faznim dijagramima ugljikovog dioksida i kisika.

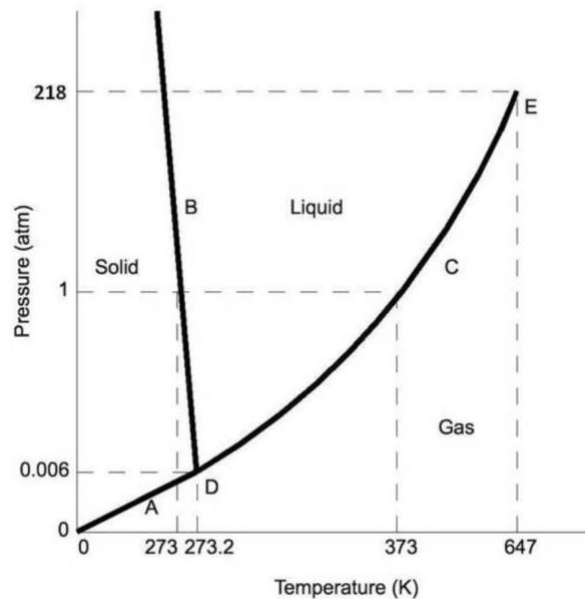
3.1 Fazni dijagram ugljikovog dioksida



Slika 3. Prikaz faznog dijagrama ugljikovog dioksida (Slika preuzeta iz izvora [2])

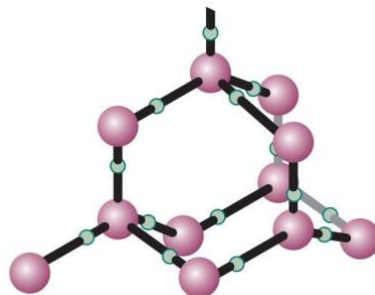
Prva važna značajka koju treba uočiti sa slike 3, a tipična je za većinu tvari ali ne i za vodu, jest pozitivan nagib krivulje na granici krute i tekuće faze. Ovakav nagib označava da temperatura taljenja raste s porastom tlaka. Primijetimo također kako se trojna točka nalazi na tlaku od 5.11 atm, što znači da tekuća faza ne postoji pri atmosferskom tlaku bez obzira na kojoj temperaturi se nalazi. Zbog toga se kruta faza sublimira u plinovitu bez prisustva tekuće faze pri zagrijavanju, odakle dolazi naziv „suhi led“.

3.2 Fazni dijagram vode



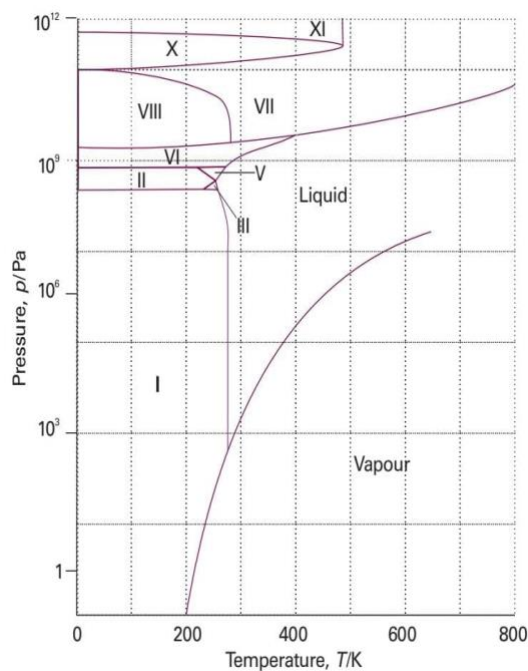
Slika 4. Fazni dijagram vod. (Slika preuzeta iz izvora [7])

Pri atmosferskom tlaku i sobnoj temperaturi voda se javlja u tekućoj fazi, snižavanjem temperature na 273 K voda prelazi u led, dok povišenjem temperature na 373 K voda prelazi u paru. Trojna točka prikazuje najnižu temperaturu od 273,16 K i tlak (611 Pa) na kojoj voda može postojati u tekućoj fazi, na slici 4 označena slovom D. Ispod tih vrijednosti led direktno prelazi u vodenu paru. Krivulja isparavanja završava s kritičnom točkom na temperaturi od 647,3 K i tlaku od 22,09 MPa. U području faznog dijagrama iznad točke E voda se ne odvaja u dvije faze, tekuću i plinovitu, već se te dvije faze izjednačavaju i njihova se fizikalna svojstva značajno mijenjaju.



Slika 5. Shematski prikaz strukture leda. (Slika preuzeta iz izvora [2])

Voda pokazuje gotovo jedinstveno ponašanje na granici krute i tekuće faze, negativan nagib krivulje taljenja/smrzavanja označava da temperatura taljenja opada porastom tlaka. Razlog ovakvom ponašanju krije se u činjenici da se volumen smanjuje taljenjem, s toga je povoljnije da kruta faza prijeđe u tekuću povećanjem temperature. Smanjenje volumena prijelazom iz krute u tekuću fazu lako je objasniti ako pogledamo strukturu molekule vode sa slike 5. Svaki atom kisika u molekuli vode povezan je dvjema kovalentnim vezama s dva atoma vodika i dvjema vodikovim vezama s obližnjim atomima kisika. Molekule vode se kristaliziraju na takav način da je prosječna udaljenost među molekulama u čvrstoj fazi veća nego u tekućoj. Na ovaj način voda ostvaruje otvorenu molekularnu strukturu leda koja se zagrijavanjem uruši, stoga su molekule vode gušće raspoređene u tekućoj nego u krutoj fazi. Upravo ovaj fenomen uzrokuje jednu od anomalija vode; voda je najgušća na 4°C. Voda se ponaša kao i ostale tvari pri smanjenju temperature, povećava joj se gustoća sve do 4°C, daljnjim smanjenjem temperature voda postaje sve rjeđa. Gušća voda tone i zato se pri dnu jezera i dalje odvija život, dok se jezero zamrzava pri vrhu.



Slika 6. Potpuni prikaz faznog dijagrama vode. Slika preuzeta iz izvora [2].

Slika 6 prikazuje potpuni fazni dijagram vode na kojem primjećujemo da voda ima više krutih faza. Osim običnog leda, led I, postoji još jedanaest različitih krutih faza od kojih se neke tope na vrlo visokim temperaturama. Čvrste se faze razlikuju po rasporedu molekula: pod utjecajem visokih tlakova vodikove veze se savijaju i molekule poprimaju različite oblike. Uz trojnu točku u kojoj koegzistiraju vodena para, voda i led I, postoji još pet trojnih točaka [8].

4 Lociranje faznih granica

Fazne granice prikazuju vrijednost tlaka i temperature pri kojima su dvije faze u ravnoteži. U ravnoteži, kemijski potencijal tvari je jednak kroz cijeli uzorak, bez obzira u koliko se faza tvar ostvaruje. U daljnjem razmatranju uzeti ćemo da je kemijski potencijal μ jednodimenzionalnog sustava jednak molarnoj Gibbsovoj energiji G_m . Gibbsova slobodna energija je termodinamički potencijal koji opisuje oslobođenu ili apsorbiranu energiju u nekom reverzibilnom procesu pri stalnoj temperaturi i tlaku, te ju možemo izraziti kao:

$$G = U + pV - TS. \quad (1)$$

Izrazimo sada infinitezimalnu promjenu Gibbsove energije i iskoristimo prvi zakon termodinamike koji nam kaže da je $dU = dQ - dW + \mu dN$:

$$dG = -SdT + Vdp + \mu dN. \quad (2)$$

Primjenjujući činjenicu da se proces odvija pri stalnoj temperaturi i tlaku izraz (2) prelazi u:

$$dG = \mu dN \quad (3)$$

, odnosno $G = \mu N$. Podijelimo li Gibbsovu slobodnu energiju s brojem čestica dobijemo molarnu Gibbsovu energiju koje je u ovom slučaju upravo jednaka kemijskom potencijalu sustava. Kemijski potencijal definiramo kao mjeru potencijala tvari da se podvrgne fizikalnim promjenama sustava.

Zamislimo sustav koji u jednom dijelu prostora ima kemijski potencijal μ_1 , te potencijal μ_2 u drugom dijelu prostora. Kada količina dn čestica prijeđe iz jednog dijela u drugi Gibbsova energija se smanji za $-\mu_1 dn$ u jednom dijelu prostora odakle su čestice uzete, te poveća za $+\mu_2 dn$ u drugom dijelu gdje su čestice dodane. Ukupna promjena Gibbsove energije jest :

$dG = (\mu_2 - \mu_1)dn$. Samo kada su kemijski potencijali jednaki, $\mu_2 = \mu_1$, ne dolazi do promjene u energiji, sustav je u ravnoteži.

4.1 Clapeyronova jednadžba

Izgleda najjednostavnije promatrati fazne granice preko njihovog nagiba dp/dT . Pustimo da se p i T mijenjaju infinitezimalno na način da dvije faze α i β ostanu u ravnoteži. Kemijski potencijali faza su u početku jednaki, budući se one nalaze u ravnoteži: $\mu_\alpha(p, T) = \mu_\beta(p, T)$. Kemijski potencijali ostaju jednaki i u sljedećoj točki nakon infinitezimalnog pomaka tlaka i temperature, s toga i njihova promjena mora biti jednaka, $d\mu_\alpha = d\mu_\beta$.

U zatvorenom sustavu promjena Gibbsove energije jednaka je $dG = Vdp - SdT$. Budući je $G_m = \mu$, znamo da je:

$$d\mu = V_m dp - S_m dT. \quad (4)$$

Iskoristimo li izraz (4) za obje faze i separiramo varijable, dobijemo:

$$(V_{\beta,m} - V_{\alpha,m})dp = (S_{\beta,m} - S_{\alpha,m})dT, \quad (5)$$

gdje su $V_{\beta,m}$ i $V_{\alpha,m}$ molarni volumeni faza, a $S_{\beta,m}$ i $S_{\alpha,m}$ molarne entropije faza. Izraz (5) možemo preurediti u Clapeyronovu jednadžbu :

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta_{trs}S}{\Delta_{trs}V} = \frac{S_{\beta,m} - S_{\alpha,m}}{V_{\beta,m} - V_{\alpha,m}} \quad (6)$$

, gdje su $\Delta_{trs}S$ i $\Delta_{trs}V$ promjene entropije i volumena pri prijelazu. Clapeyronova jednadžba nam daje nagib fazne granice za bilo koju tvar u faznoj ravnoteži. Također nam omogućava da poznavajući termodinamičke podatke možemo pretpostaviti ponašanja u faznom dijagramu.

4.2 Granica krute i tekuće faze

Taljenje prati promjenu molarne entalpije $\Delta_{tal}H$ i događa se pri točno određenoj temperaturi T . Tada je molarna entropija taljenja jednaka $\Delta H/T$ i Clapeyronova jednadžba glasi:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta_{tal}H}{T\Delta_{tal}V} \quad (7)$$

, gdje je $\Delta_{tal}V$ promjena molarnog volumena sustava. Uzmemo li da se $\Delta_{tal}H$ i $\Delta_{tal}V$ mijenjaju toliko malo s temperaturom i tlakom da pri integraciji mogu izaći ispred integrala, uz granice T^* i p^* koje označavaju temperaturu i tlak taljenja, možemo zapisati integral kao:

$$\int_{p^*}^p dp = \frac{\Delta_{tal}H}{\Delta_{tal}V} \int_{T^*}^T \frac{dT}{T} \quad (8)$$

,a njegovo rješenje kao:

$$p \approx p^* \frac{\Delta_{tal}H}{\Delta_{tal}V} \ln \frac{T}{T^*}. \quad (9)$$

Aproksimiramo li logaritam koristeći izraz:

$$\ln \frac{T}{T^*} = \ln \left(1 + \frac{T - T^*}{T^*} \right) \approx \frac{T - T^*}{T^*} \quad (10)$$

jednadžbu (9) možemo zapisati kao:

$$p \approx p^* \frac{\Delta_{tal}H}{T^*\Delta_{tal}V} (T - T^*). \quad (11)$$

4.3 Granica tekuće i plinovite faze, te krute i plinovite faze

Entropija isparavanja na temperaturi T je jednaka $\Delta_{isp}H/T$, te Clapeyronova jednačba glasi:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta_{isp}H}{T\Delta_{isp}V} \quad (12)$$

Budući je molarni volumen plina puno veći od molarnog volumena tekućine, možemo uzeti da je $\Delta_{isp}V \approx V_m(plin)$. Ako se plin ponaša kao idealan, $V_m(plin) = RT/p$, jednačba (12) poprima drugi oblik, koju još nazivamo i Clausius-Clapeyronova jednačba:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta_{isp}H}{T(RT/p)} \quad (13)$$

Iskoristimo li sada da je $dx/x = d \ln(x)$, možemo integrirati izraz (13) :

$$\int_{\ln(p^*)}^{\ln(p)} d \ln(p) = \frac{\Delta_{isp}H}{R} \int_{T^*}^T \frac{dT}{T^2} = -\frac{\Delta_{isp}H}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^*} \right) \quad (14)$$

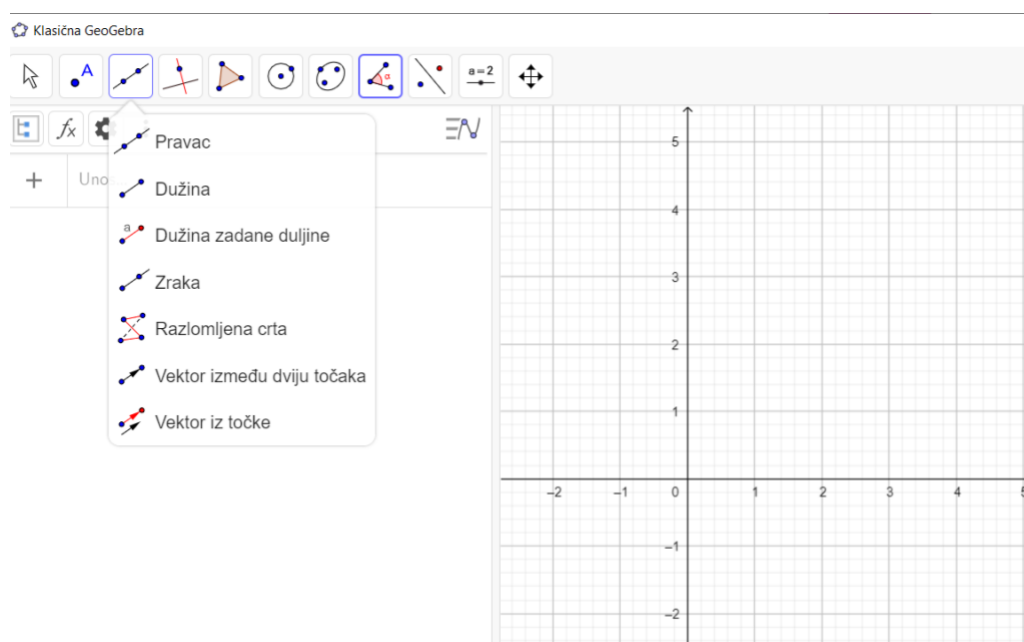
,gdje su T^* i p^* temperatura i tlak isparavanja. Integriranjem dobijemo jednačbu fazne granice između tekuće i plinovite faze :

$$p = p^* e^{-\varepsilon} \quad \varepsilon = \frac{\Delta_{isp}H}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^*} \right). \quad (15)$$

Clausius-Clapeyronova jednačba nam određuje fazne granice na prijelazu iz tekuće u plinovitu, ali i na prijelazu iz krute u plinovitu fazu. Na prijelazu između tekućine i plina fazna granica se ne produljuje duže od kritične točke, već se tu zaustavlja i dalje nastupa natkritična faza. Jedina razlika u primjeni jednačbe (15) za prijelaz između krute i plinovite faze je u tome što promjenu entalpije sublimacije definiramo kao: $\Delta_{sub}H = \Delta_{tal}H + \Delta_{isp}H$, prema tome predviđamo strmiji nagib za krivulju sublimacije nego za krivulju isparavanja na sličnim temperaturama oko trojne točke.

5 Rad u GeoGebri

GeoGebra je matematički alat u kojem se na interaktivan način prikazuju grafovi funkcija, geometrijski oblici, a može koristiti i pri računanju. U svrhu izrade faznog dijagrama vode korištena je verzija GeoGebra Classic. Na slici 7 vidimo početnu stranicu u kojoj se klikom na određenu ikonu pojavljuje padajući izbornik s elementima koje dodajemo u koordinatnu mrežu. Osim dodavanja osnovnih elemenata kao što su točke, dužine, pravci i mnogokuti, korištena je mogućnost prilagođavanja funkcije na dvije točke, te upotreba logičkih varijabli. GeoGebra se pokazala kao odličan alat pomoću kojeg smo došli do cilja ovog završnog rada; izrade jednostavnog i poučnog faznog dijagrama vode.

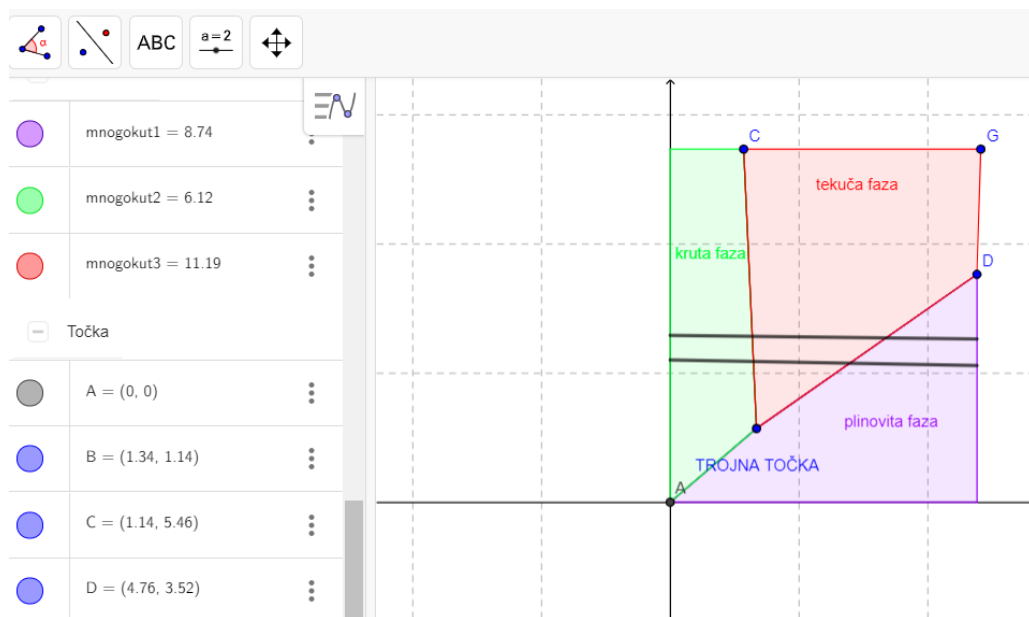


Slika 7. Prikaz početnog prozora GeoGebre.

5.1 Izrada faznog dijagrama

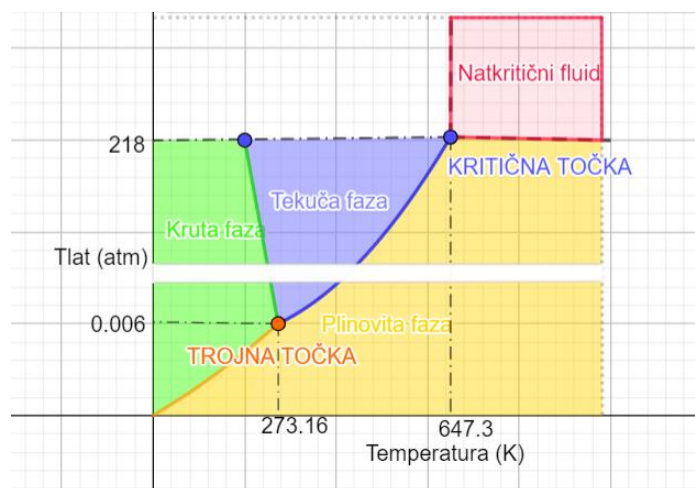
Proces izrade faznog dijagrama odvijao se preko više iteracija. Ideja je bila početi od jednostavnog prikaza koji samo približno daje naslutiti da je dijagram podijeljen u tri faze, za sada samo ravnim crtama kao na slici 8, te dorađivanjem istog izraditi što realniji prikaz. U prvoj iteraciji u koordinatnu mrežu su dodane 4 točke povezane dužinama, te mnogokutima osjenčani dijelovi faznog dijagrama koji označavaju različite faze. Desnim klikom na bilo koji objekt u koordinatnoj mreži pojavljuje se izbornik u kojem odabirom na polje „Postavke“ možemo mijenjati boju objekta, pridružiti naziv svakom objektu ili u potpunosti sakriti objekt. Na slici 8 vidimo kako su kod crvenog mnogokuta sve točke prikazane, dok su kod zelenog

mnogokuta neke od točaka skrivene. Već u prvoj iteraciji su uklonjeni brojevi s koordinatnih osi, jer fazni dijagram nije moguće prikazati u realnom omjeru, odnosno dio grafičkog prikaza dijagrama je izostavljen budući da na istom prikazu trebamo imati trojnu točku koja se nalazi na tlaku od 0.006 atm i kritičnu točku na tlaku od 218 atm. Područje koje je izostavljeno na grafu je prikazano kao skok s vrijednosti niskog tlaka na vrijednosti visokog tlaka pomoću dviju paralelnih dužina koje sijeku graf po sredini.



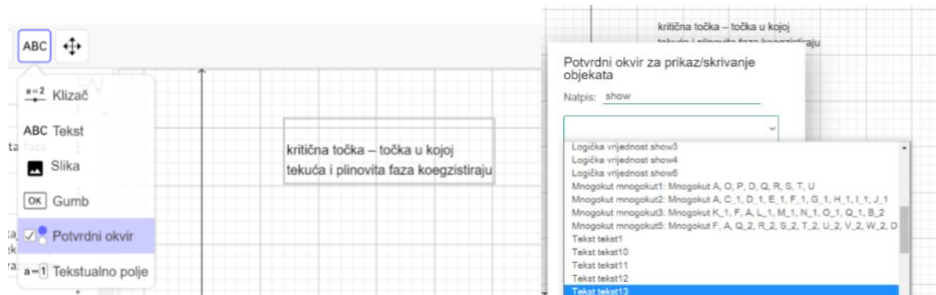
Slika 8. Prva iteracija faznog dijagrama vode.

U drugoj iteraciji sa slike 9 bolje su definirane karakteristične točke i krivulje, dodane su vrijednosti na x i y osi, te je opisano dodatno područje natkritičnog fluida koje se javlja u područjima tlakova i temperatura čije su vrijednosti više od kritične točke. Skok u faznom dijagramu je ispunjen bijelom bojom kako bi se naglasio prijelaz u prikazu grafa na niskim i visokim tlakovima.



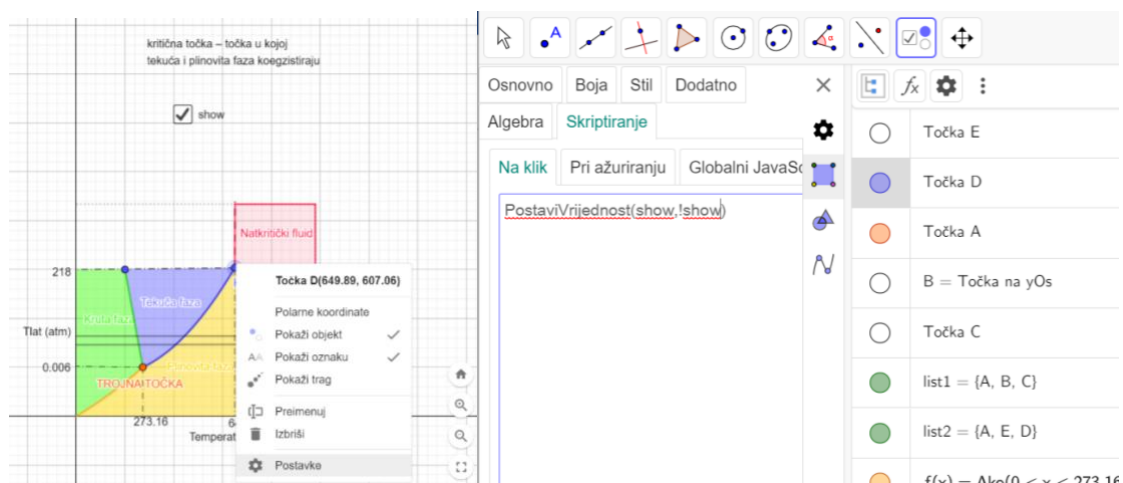
Slika 9. Druga iteracija izrade faznog dijagrama.

Početna ideja, ali i sama motivacija završnog rada je pojednostavljenje i edukativan prikaz faznog dijagrama vode, stoga daljnja izrada grafičkog prikaza ide k tome da se interaktivnim metodama usvoje ključni pojmovi i koncepti važni za razumijevanje faznog dijagrama vode. Želja je bila da klikom na karakteristične objekte u faznom dijagramu iskoči prozor s definicijom odabranog objekta. Na slici 10 se može pratiti slijed izrade interaktivnog sadržaja. U prvom koraku ispišemo tekst koji definira određeni objekt (slika 10.a), odabirom na opciju „Potvrđni okvir“ kreiramo logički tip varijable koji kada je označen kao istinit prikazuje objekt, a kada je označen kao laž sakriva objekt. Sada je potrebno pridružiti objekt na koji se odnosi „Potvrđni okvir“, a to jest „Tekst tekst13“. U koordinatnoj mreži trenutno imamo tekst koji se pokazuje i skriva klikom na „Potvrđni okvir“, a cilj nam je da se to događa klikom na točku. Odabirom točke izlazi padajući izbornik u kojem izaberemo „Postavke“ (slika 10.c), te u prozoru „Skriptiranje“ „Na klik“ unesemo naredbu kojom povezujemo klik na točku s promjenom vrijednosti logičkog tipa varijable (istina/laž). Kada su te dvije radnje sinkronizirane sakrijemo objekt „Potvrđni okvir“ iz koordinatne mreže i uredimo prozor u kojem se nalazi tekst. Ovaj postupak ponovimo za sve objekte koje želimo jasnije približiti korisniku.



10.a) Ispis teksta.

10.b) Izrada „Potvrđnog okvira“.

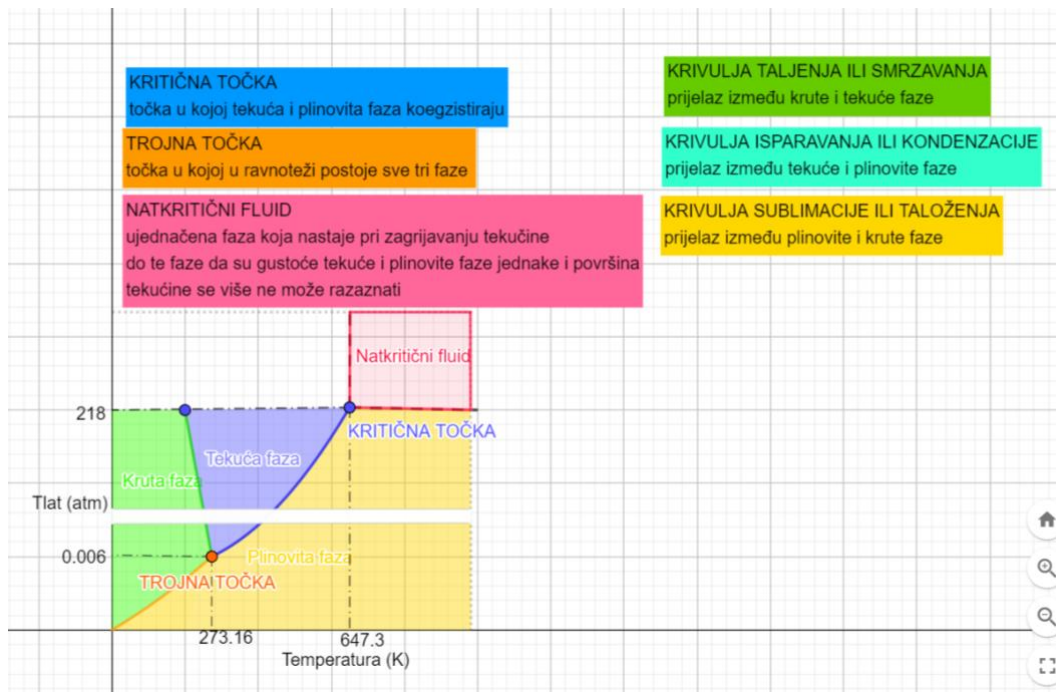


10.c) Dodavanje svojstva točki.

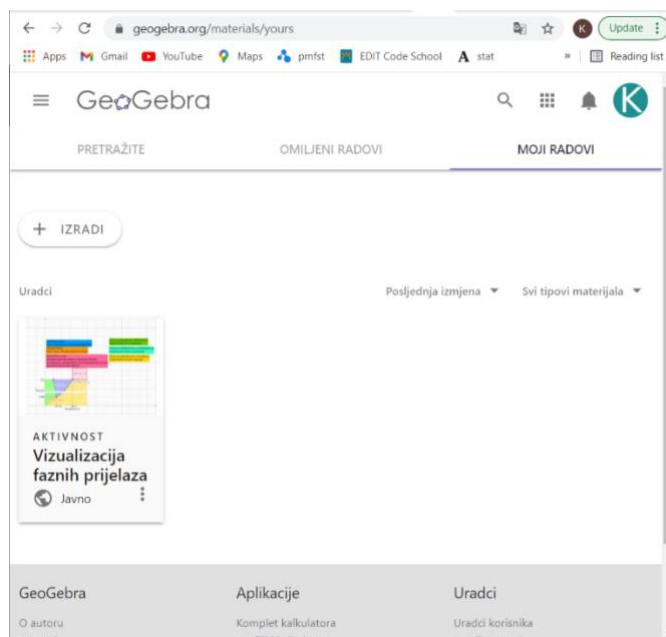
10.d) Pridruživanje teksta točki.

Slika 10. Postupak pridruživanja teksta točki koji se pojavljuje i skriva klikom na točku.

Krajnja verzija faznog dijagrama prikazana je na slici 11, u tom prikazu su otvoreni svi tekstualni prozori koji definiraju karakteristične dijelove dijagrama. Online verzija rada nalazi se na web stranici GeoGebre ²(vidi slika 12).



Slika 11. Konačna verzija vizualizacije faznog prijelaza vode.



Slika 12. Prikaz rada na web stranici GeoGebre.

² <https://www.geogebra.org/search/vizualiziranje%20faznih%20prijelaza%20vode>

6 Zaključak

Značaj vode je neupitan za opstanak života na Zemlji, ali ni njezini fazni prijelazi nisu ništa manje važni. Fazni dijagram nam omogućava razumijevanje odnosa faza (krute, tekuće i plinovite) i faznog granica na najjednostavniji način, te opisuje ovisnost faza o temperaturi i tlaku. Fazni dijagrami definiraju ujednačena kemijska i fizikalna svojstva tvari na makroskopskoj razini koja se javljaju samo u određenim granicama. Te granice nazivaju se fazne granice i predstavljaju područje prijelaza iz jedne faze u drugu, u kojem obje faze koegzistiraju u ravnotežnom stanju. Postoje i vrijednosti tlaka i temperature takve da se sve tri faze javljaju u ravnoteži, te vrijednosti su jedinstvene za svaku tvar, a prikazane su na faznom dijagramu trojnom točkom. Druga karakteristična točka svakog faznog dijagrama je kritična točka nakon koje se, na višim tlakovima i temperaturama, plinovita i tekuća faza stapaju u jednu fazu koju nazivamo natkritični fluid. Objekti točke imaju jedinstvene vrijednosti tlaka i temperature karakteristične za svaku pojedinu tvar. Faznu granicu krute i tekuće faze lociramo pomoću Clapeyronove jednadžbe iz uvjeta da dvije faze koegzistiraju u ravnoteži samo ako imaju jednaki kemijski potencijal. Uz pretpostavku da ponašanje plinovite faze možemo aproksimirati modelom idealnog plina prijelaz iz plinovite u tekuću i krutu fazu lociramo pomoću Clausius-Clapeyronove jednadžbe. Iz ovih jednadžbi možemo izraziti eksplicitnu ovisnost tlaka o temperaturi i prikazati je krivuljom u faznom dijagramu.

Odmah na prvi pogled možemo uočiti jedinstvenost faznog dijagrama vode u usporedbi s faznim dijagramom drugih tvari, jer ga karakterizira negativan nagib krivulje taljenja/smrzavanja. To jedinstveno ponašanje uzrokovano je činjenicom da je voda gušća u tekućoj nego u krutoj fazi, što općenito nije slučaj za druge tvari. Posljedice ovakvog ponašanja vode su uglavnom pozitivne za život na Zemlji, kao što je održavanje biljnog i životinjskog svijeta na dnu jezera koje je smrznuto na površini.

Matematički digitalni alat GeoGebra omogućila je jednostavan i interaktivan prikaz faznog dijagrama vode. Cilj završnog rada je postignut u obliku izrade edukativnog sadržaja koji će pomoći učenicima i studentima u razumijevanju faznih prijelaza vode.

7 Literatura

- [1] <https://hr.wikipedia.org/wiki/Voda> (12.8.2021.)
- [2] P.W. Atkins, J. de Paula, Atkin's Physical Chemistry 8th Ed., Oxford, University Press, 2006.
- [3] <http://www.geogebra.org>
- [4] L. Glasser, L. Water, Water, Everywhere: Phase Diagram of Ordinary Water Substance. *J. Chem. Educ.* (2004) **81**: 3
- [5] A. Herráez, R.M. Hanson and L. Glasser. Interactive 3D phase diagrams using Jmol. *J. Chem. Educ.* (2009) **86**: 566
- [6] E. Generalic, URL:
<https://glossary.periodni.com/glosar.php?hr=superkriti%C4%8Dni+fluid> (17.8.2021)
- [7] Phase Diagrams,
URL:[https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Physical_Properties_of_Matter/States_of_Matter/Phase_Transitions/Phase_Diagrams](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Physical_Properties_of_Matter/States_of_Matter/Phase_Transitions/Phase_Diagrams)
(17.8.2021)
- [8] The Phase Diagram of Water,
URL: <https://ergodic.ugr.es/termo/lecciones/water1.html>(26.8.2021.)